

INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 18672, Fax +49 (0)391 67 12223
ich@uni-magdeburg.de

1. Leitung

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann
Jun.-Prof. Dr. Edgar Haak
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler (Institutsleiterin)
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß
Dr. Volker Lorenz
Frau Ines Sauer

2. Hochschullehrer

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann
Hon.-Prof. Dr. Ernst R.F. Gesing
Jun.-Prof. Dr. Edgar Haak
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß
PD Dr. rer. nat. habil. Jochen Vogt

3. Forschungsprofil

AG Anorganische Chemie

- Siliciumchemie: Silsesquioxane, Metallasilsesquioxane
- Präparative und Strukturuntersuchungen an Organometallkomplexen der Lanthanoide
- Koordinationschemie der f-Elemente
- Metallorganische Chemie der frühen Übergangsmetalle
- NMR-Untersuchungen an paramagnetischen Lanthanoidkomplexen
- Röntgenstrukturanalysen an Organolanthanoidkomplexen
- Untersuchungen zur Homogenkatalyse mit Lanthanoidmetallocenen
- Entwicklung neuer Metallocenkatalysatoren für die Olefinpolymerisation
- Entwicklung von Modellverbindungen für lanthanoiddotierte Zeolith-Katalysatoren
- Koordinationschemie von Fulvenen und Azulenen
- Synthese von molekularen Vorstufen für MOCVD-Verfahren (III/V- und II/VI-Halbleiter, Metallnitride, Metallboride, Strontium-Bismut-Tantalat (SBT), Blei-Zirconat-Titanat (PZT))
- Untersuchungen zur bioanorganischen Chemie der Lanthanoide
- Spezielle Aspekte der Hauptgruppenchemie (Stannylene, Plumbylene, nichtklassische Mehrfachbindungen)
- Präparative Fluorchemie
- Ferrocenchemie

- Supramolekulare Strukturchemie von Organozinnverbindungen
- Koordinationschemie von Oxo- und Cyanokohlenstoffanionen

AG Organische Chemie

- Entwicklung moderner Synthesemethoden: Diastereo- und enantioselective C-C-Verknüpfungen
- Metallorganische Chemie: Synthese und Reaktionen von Chrom-, Mangan-, Silicium- und Zinn-Verbindungen
- Synthese von Heterocyclen durch Tandemreaktionen
- Wirkstoffsynthese: Stereoselektive Synthese von biologisch aktiven Substanzen
- Struktur-Wirkungs-Beziehungen
- Naturstoffchemie: Synthese von Terpenen, Alkaloiden und Macroliden
- Computeranwendungen in der Chemie: Reaktionsdatenbanken und Molecular Modelling

AG Physikalische Chemie

- "Membranunterstützte Reaktionsführung": Adsorption, Reaktion und Desorption an anorganischen, katalytisch aktivierten Membranmaterialien
- Charakterisierung vanadium- und eisenhaltiger Katalysatoren mit Photoelektronenspektroskopie und Infrarotspektroskopie
- Ceroxid-basierte Abgaskatalysatoren: Einfluß von Dotierung, Temperatur, Reduktionsgrad und Leerstellenkonzentration auf katalytische Aktivität, Oberflächenstruktur und -dynamik
- "Inverse Katalysatoren": Beeinflussung der katalytischen CO-Oxidation auf Edelmetallen durch Ceroxid
- Katalytische Reaktionen auf atomarer Skala
- Struktur, Thermodynamik und Dynamik reiner und adsorbatbedeckter Isolator-Einkristallflächen

AG Technische Chemie

- Katalysatorentwicklung: Zeolithe und zeolithartige Materialien, Optimierung der Struktur, Oberflächenchemie, Morphologie
- Beschichtungen: Trägergestützte (Reaktiv-)Kristallisation von katalytisch aktiven Systemen
- Zelluläre Kompositmaterialien: katalytisch aktive Keramik- und Glasformkörper durch neue Prozessierungsverfahren
- Thermische Energiespeicherung: Support für Wärmespeichermaterialien, neuartige (keramische und hybride) Wärmespeichermaterialien
- Thermoelektrika: Prozessierung von thermoelektrischen Pulvern mittels Techniken aus der keramischen Fertigung
- Photokatalyse: Entwicklung und Testung monolithisch getragener Katalysatoren auf Titanoxidbasis

4. Serviceangebot

NMR-Messungen verschiedener Kerne an Feststoffen und Flüssigkeiten

Röntgenpulverdiffraktometrie (XRD) in Reflexion, Transmission und Kapillare, auch temperaturabhängig

Stickstoff-Tieftemperaturadsorption

Katalysatorrestung

5. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Dr. Alexandra Lieb

Förderer: Haushalt; 01.07.2009 - 31.12.2012

Darstellung und Charakterisierung neuer Boroarsenate

Boroarsenate ähneln strukturell den Silicaten, da beide Verbindungsklassen als Grundbaueinheiten TO₄-Einheiten (T = B, As, Si) aufweisen. Durch die nahezu unbegrenzten Möglichkeiten durch Eckenverknüpfung aus diesen Tetraederbausteinen verschiedene strukturelle Baueinheiten zu erhalten ist eine unendlich große Variabilität dieser Verbindungsklassen denkbar. Solche Gerüstverbindungen unterschiedlicher chemischer Natur werden in vielerlei Hinsicht zur Anwendung gebracht. Man unterscheidet dabei nicht-poröse und poröse Systeme, wobei die porösen Systeme z. B. zur Gasreinigung- und -speicherung oder zur heterogenen Katalyse eingesetzt werden. Nicht-poröse Systeme können z. B. als Grundstrukturen für Lumineszenzkonversionsfarbstoffe dienen. Der Einbau von unterschiedlichen Tetraederzentren in Tetraedernetzwerkstrukturen bedingt oft die Ausbildung von Gerüsten mit modifizierten Eigenschaften, die somit besser an potentielle Anwendungen angepasst sein können. Auf dem Gebiet der Boroarsenate (T = B, As) sind erst relativ wenige Verbindungen ausreichend charakterisiert. Durch die Untersuchung der Boroarsenate soll das strukturelle Potential der Verbindungsklasse ausgelotet werden. Hierbei werden die neuen Strukturen sowohl mit Röntgen- als auch mit Neutronenbeugung untersucht, wobei gekoppelte Verfeinerungen zur genaueren Lokalisierung von Wasserstoffatomen angewendet werden. Wasserstoffatome liegen als Gerüst-OH-Gruppen oder in eingelagerten Wassermolekülen vor und können die Eigenschaften der Verbindungen einschneidend beeinflussen.

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Susan Muschalle

Förderer: BMWi/AIF; 01.04.2010 - 28.02.2013

Energieeffiziente Thermoelektrische Generatoren durch Material- und Fertigungsoptimierung

Basierend auf dem prinzipiellen Funktionsnachweis der Herstellung thermoelektrisch aktiver Schichten aus Suspensionen, werden thermoelektrische Tapes mittels Tape casting und weiteren Druck- und Beschichtungsverfahren erzeugt. Ziel ist es eine kostengünstige Technologie für die großflächige Verarbeitung von TE-Materialien zu entwickeln.

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Dr. Alexandra Lieb

Förderer: Haushalt; 01.07.2010 - 30.06.2013

Silangestützte MOF-Schichten

Die Substanzklasse der metall-organischen Koordinationspolymere steht momentan im Fokus vieler weltweiter Forschungsaktivitäten, hauptsächlich im Hinblick auf die Anwendbarkeit solcher Systeme bei Gasspeicherung und -separation, der Katalyse oder der Wirkstofffreisetzung (drug delivery). MOFs bestehen aus einem organischen Teil (Linker/Ligand) und Metall-Ionen oder Metalloxid-Clustern (Knoten), welche sich zu dreidimensionalen Netzwerken verbinden. Sie können sehr große (innere) Oberflächen aufweisen, die genutzt werden können. Hierbei ist besonders interessant, dass durch den modularen, hybriden Aufbau der MOFs eine einfache post-synthetische Modifizierung ermöglicht wird. Da MOFs bei der Synthese stets als feine Pulver anfallen, sind sie zumeist in ihrer as-synthesised-Form für eine industrielle Anwendung nicht geeignet. Es ist deshalb nötig die Materialien durch Trägerung oder Formgebung in eine besser verwendbare Form zu bringen. Eine Möglichkeit der Trägerung stellt die silangestützte Beschichtung von Gläsern dar, bei der das MOF-Material durch geeignete Zwischenschichten chemisch auf dem Untergrund verankert wird. Hierbei können speziell geformte Substrate zum Einsatz kommen, die nach der Beschichtung den Einsatz der MOF-Materialien in verschiedenen Reaktortypen ermöglichen.

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Susann Holze

Förderer: Haushalt; 01.10.2008 - 31.12.2012

TiO₂-beschichtete Glasschäume für die Abwasserreinigung

TiO₂-Nanopartikel stellen effiziente photoaktive Katalysatoren für die Zersetzung von organischen Schadstoffen dar. Die Fixierung der Partikel auf einem zellularen (porösen), lichtdurchlässigen Festkörper könnte den technischen Einsatz dieser Materialien wesentlich vereinfachen und die Effizienz erheblich steigern. Hierzu werden polymerabgeleitete

keramische Schäume entwickelt, denen Glas als Füllstoff zugesetzt wird. Über die Variation der Ausgangsstoffe und der Prozessbedingungen können Struktur und Eigenschaften der Schaumkomposite in weiten Bereichen beeinflusst werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Ronny Syre

Förderer: DFG; 01.11.2011 - 31.10.2013

Atomlagenabscheidung von Germanium-Antimon-Tellurid

Germanium-Antimon-Tellurid-Schichten zeigen eine hohe, mehrere Größenordnungen betragende Änderung des Schichtwiderstands bei Übergang von der kristallinen in die amorphe Phase und umgekehrt. Diese Eigenschaft lässt sich zur nicht-flüchtigen Speicherung von Informationen benutzen. Eine mögliche bedeutende Anwendung dieser Schichten ist in den sogenannten PCRAMs (Phase Change Random Access Memory) gegeben. Im Rahmen des beantragten Vorhabens sollen dünne Schichten aus Germanium- Antimon-Tellurid ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, abgekürzt: GST) mittels Atomlagenabscheidung unter Verwendung von neu für diesen Prozess zu entwickelnder Germanium-, Antimon- und Tellur- Precursoren auf Amidinat- und Guanidinatbasis niedergeschlagen und charakterisiert werden. Die Charakterisierung der hergestellten Materialien erfolgt hinsichtlich ihrer Zusammensetzung, ihrer Struktur, ihrer Morphologie und ihrer elektrischen Eigenschaften. Zur Charakterisierung des Übergangs von der amorphen zur kristallinen bzw. von der kristallinen zur amorphen Phase und des Speichereffekts sollen fein strukturierte Testbauelemente bestehend aus Metall/GST-Schicht/Metall-Widerstandsstrukturen untersucht werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Peter Dröse

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2009 - 30.06.2014

Carboranylamidinate

Die in unserem Arbeitskreis entwickelten Carboranylamidinat-Anionen stellen ein neuartiges multifunktionelles Ligandensystem dar. Im Rahmen des Projekts sollen die Ligandeneigenschaften dieser Anionen untersucht und Komplexverbindungen mit Hauptgruppenelementen, Übergangsmetallen und f-Elementen hergestellt und charakterisiert werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Dr. Anja Edelmann

Förderer: DFG; 01.06.2006 - 31.05.2011

Chemie des Cerocens - Von Sandwichkomplexen zu Multideckern

Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll die bislang kaum bekannte Chemie des Cerocens und seiner Derivate erforscht werden. Hauptziel dieser Untersuchungen ist die Synthese und strukturelle Charakterisierung neuartiger Organolanthanoidverbindungen, wie beispielsweise Tetradecker-Sandwichkomplexe. Weitere Aspekte des Forschungsvorhabens beinhalten Versuche zur Synthese von Cerocenanalogen anderer Lanthanoiden sowie der ersten Halbsandwich-Komplexe mit formal vierwertigem Cer.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Dr. Anja Edelmann, Dr. Volker Lorenz

Förderer: DFG; 01.05.2008 - 30.04.2013

Heterobimetallische Disiloxandiolate und Metallasilsesquioxane der Lanthanoide - Neuartige Metallakronen und Clustermoleküle

Für den zweiten Antragszeitraum des laufenden Forschungsvorhabens ist geplant, die mit Hilfe von anionischen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden und Silsesquioxanderivaten erschlossene Klasse neu-artiger Organolanthanoidkatalysatoren auszuweiten. Hauptziel dieser Untersuchungen ist, diese Verbindungen, die als "anorganische Lanthanoidmetallocene" bezeichnet werden können, als Ausgangspunkt für die Synthese und strukturelle Charakterisierung hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Lithiumdisiloxandiolat- und Silsesquioxanliganden zu nutzen. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Untersuchung der Reaktivität (Katalyse) und des Synthesepotentials der dargestellten Disiloxandiolat- und Silsesquioxan-komplexe. Weitere Teilziele umfassen die Synthese neuartiger heterobimetallischer Lanthanoidkomplexe mit Si-O-Liganden sowie die Darstellung von Disiloxandiolat- und Silsesquioxan-Komplexen zweiwertiger Lanthanoide.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Girma Kibatu Berihie, Thomas Wagner, John W. Gilje (James Madison University)
Förderer: Haushalt; 01.04.2010 - 31.03.2014

Koordinationschemie des Acrylamids und N-Pyrazolylpropanamids

Acrylamid ist aufgrund seines Vorkommens in frittierten Lebensmitteln unter Umweltgesichtspunkten in das öffentliche Blickfeld gerückt. Dieses Projekt, angesiedelt im Bereich der bioanorganischen Chemie, soll mithelfen, die Wechselwirkung zwischen Acrylamid und biologisch relevanten Übergangsmetall-Ionen besser zu verstehen. Eine aktuelle Weiterentwicklung beinhaltet die Untersuchung der Koordinationschemie von neuartigen Liganden, die sich vom Acrylamid ableiten. Dazu gehören insbesondere das N-Pyrazolylpropanamid und das N-Triazolylpropanamid.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Dr. Volker Lorenz
Kooperationen: Astrium GmbH; Dow Olefinverbund GmbH; Dracosa AG Bitterfeld-Wolfen; Lapua GmbH, Schönebeck
Förderer: DFG; 01.09.2011 - 31.08.2014

Metallasilsesquioxane

Funktionalisierte Disiloxane und Silsesquioxane als Bausteine für neuartige komplexe Moleküle und Polymermaterialien auf Si-O-Basis.

Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens sollen monofunktionalisierte bzw. monoanionische Disiloxane und Silsesquioxane zum Aufbau komplexer Moleküle und Polymermaterialien auf Si-O-Basis verwendet werden. In einem ersten Schwerpunkt des Vorhabens soll mit Hilfe von anionischen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden eine Klasse neuartiger f-Elementkomplexe etabliert werden, die als "anorganische Lanthanoidmetallocene" bezeichnet werden kann. Ziel dieser Untersuchungen ist die Synthese hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Siloxandiolat-Liganden. Im Zweiten Schwerpunkt spielen die monofunktionalisierten Silsesquioxanderivate (C₆H₁₁)₇Si₈O₁₂(OH) (3) und (C₆H₁₁)₇Si₈O₁₂(OLi) (4) eine zentrale Rolle. Mit ihrer Hilfe sollen neuartige, zwei- und dreidimensionale komplexe Moleküle wie z.B. Silsesquioxan-substituierte anorganische Ringe, Käfige und Dendrimere sowie Polymermaterialien aufgebaut werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Dr. Anja Edelmann, Dr. Volker Lorenz
Förderer: DFG; 01.06.2008 - 31.05.2013

Multidecker-Sandwich-Komplexe der Lanthanoide

Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll die bislang kaum bekannte Chemie des Cerocens und seiner Derivate erforscht werden. Hauptziel dieser Untersuchungen ist die Synthese und strukturelle Charakterisierung neuartiger Organolanthanoidverbindungen, wie beispielsweise Tetradecker-Sandwichkomplexe. Weitere Aspekte des Forschungsvorhabens beinhalten Versuche zur Synthese von Cerocenanalogen anderer Lanthanoidelemente sowie der ersten Halbsandwich-Komplexe mit formal vierwertigem Cer.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Peter Dröse, Farid Sroor
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2010 - 30.06.2014

Organometall- und Koordinationsverbindungen Cers und Europiums

Das Projekt beinhaltet die Synthese und Strukturaufklärung neuartiger Organometall- und Koordinationsverbindungen des Cers. Ein weiteres wichtiges Ziel des Projekts ist die Weiterentwicklung der Koordinationschemie von Cer(IV) im Hinblick auf mögliche katalytische Anwendungen. Weiterhin sollen neuartige Komplexverbindungen des Europiums synthetisiert und auf ihre Lumineszenzeigenschaften hin untersucht werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Peter Dröse

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.10.2009 - 30.09.2014

Phenylioddichlorid - Ein innovatives Reagens zur Synthese von Cer(IV)-Verbindungen

Im Rahmen eigener Vorarbeiten konnte kürzlich gezeigt werden, dass das leicht zugängliche Phenylioddichlorid, PhICl_2 , ein innovatives Reagens in der Lanthanoidchemie darstellt und insbesondere für die Synthese von funktionalisierbaren Komplexverbindungen der vierwertigen Cers geeignet ist. Das bekannte Cer(IV)amid Im Rahmen eigener Vorarbeiten konnte kürzlich gezeigt werden, dass das leicht zugängliche Phenylioddichlorid, PhICl_2 , ein innovatives Reagens in der Lanthanoidchemie darstellt und insbesondere für die Synthese von funktionalisierbaren Komplexverbindungen der vierwertigen Cers geeignet ist. Das bekannte Cer(IV)amid $[(\text{Me}_3\text{Si})_2\text{N}]_3\text{CeCl}$ sowie das neuartige Cer(IV)amidinat 3CeCl konnten unter Verwendung von PhICl_2 leicht und mit guten Ausbeuten synthetisiert werden. Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll zunächst die neuartige Substanzklasse der Cer(IV)amidinate eingehend erforscht und strukturell charakterisiert werden. Gegebenenfalls sollen auch ringsubstituierte Derivate des Phenylioddichlorids zum Einsatz kommen. Ausgehend von den Cl-funktionalisierten Cer(IV)amidinen soll versucht werden, erstmals Organocer(IV)-Verbindungen mit -Alkyl-Liganden zu synthetisieren. Dieses Ziel könnte durch Verwendung nicht-reduzierender Alkylierungsmittel wie ZnMe_2 oder SnMe_4 erreicht werden. Im weiteren Verlauf des geplanten Forschungsvorhabens soll versucht werden, mit Hilfe des Phenylioddichlorids neuartige Organocer(IV)-Komplexe mit Cyclopentadienyl- oder Cyclooctatetraenyl-Liganden zu erschließen.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Raik Deblitz

Förderer: Haushalt; 01.11.2008 - 31.10.2013

Stickstofffreie energetische Verbindungen

Das Projekt beinhaltet die Entwicklung und Erprobung stickstoffreicher energetischer Verbindungen für die Pyrotechnik. Von besonderem Interesse sind dabei neuartige umweltfreundliche (weil schwermetallfreie) stickstoffreiche Verbindungen.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Farid Sroor

Förderer: DAAD; 01.04.2011 - 31.10.2014

Synthese von Cerdioxid-Nanopartikeln in Ionischen Flüssigkeiten

Ziele des Projekts ist die Synthese und Charakterisierung von Cerdioxid-Nanopartikeln in ionischen Flüssigkeiten als Reaktionsmedium. Als Ausgangsmaterialien sollen neuartige Cer(IV)-Komplexes mit Amidinat- und Disiloxandiolat-Liganden verwendet werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Förderer: DFG; 01.07.2009 - 30.06.2012

Aufklärung der Struktur und Absolutbedeckung des Adsorbates Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen

Das Adsorptionssystem Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen ist aufgrund seiner Relevanz für verschiedenste Bereiche experimentell wie auch theoretisch wiederholt untersucht worden. Für die gesättigte erste Lage wurden zwei verschiedene Strukturen beobachtet eine (1x1)- und eine c(4x2)-Struktur. Es konnte gezeigt werden, dass erstgenannte erst durch Elektro-neneinfluss (z.B. bei Beugung langsamer Elektronen, LEED) irreversibel in die c(4x2)-Struktur umgewandelt wird. Der Mechanismus ist nicht verstanden, kann aber von großer Bedeutung auch für andere Systeme sein, da LEED eine elementare Untersuchungsmethode zur Strukturaufklärung ist. Unklarheit herrscht auch über den Bedeckungsgrad; hier wurden für die erste Lage Wasser zwischen 0,5 und 3 Moleküle je NaCl(100)-Elementarzelle vorgeschlagen. Theoretische Untersuchungen trugen bislang wenig zur Klärung bei. Das vorliegende Projekt soll jetzt, durch Bündelung von LEED (mit I(V)-Analyse) u.a. mit Helium-Atomstrahlstreuung, Infrarot-spektroskopie und Röntgen-Photoelektronenspektroskopie, einen unter vergleichbaren Bedingungen gewonnenen, konsistenten Datensatz für die erste Wasserlage auf NaCl(100)-Einkristallflächen liefern, die Absolutbedeckung und Struktur klären, sowie den Mechanismus der elektroneninduzierten Strukturumwandlung aufdecken.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dr. Stefan Becker, Kathleen Müller

Förderer: Sonstige; 01.07.2008 - 31.12.2011

Spektroskopische in situ-Untersuchungen der katalytischen CO-Oxidation an oxidmodifizierten Platinmetalloberflächen

Im Rahmen dieses Vorhabens soll der Einfluss von wohldefinierten und charakterisierten Oxidfilmen im Submonolagenbereich auf die katalytische CO-Oxidation an Platinmetallen untersucht werden. Derartige Systeme sind invers zu den üblichen Trägerkatalysatoren, die vielfach aus einem Edelmetall auf einem oxidischen Träger bestehen; ihre Untersuchung läßt vielfältige komplementäre Informationen erwarten. Zu diesem Zweck sollen zunächst, ähnlich zum schon untersuchten "inversen Modellkatalysator" CeOx/Pt(111), CeOx/Pt(110)- und CeOx/Pt(100)-Modellkatalysator-systeme, bestehend aus CeOx-Submonoschichten auf der entsprechenden Pt-Einkristallfläche, erzeugt und studiert werden. Ziel ist, für verschiedene CeOx-Bedeckungsgrade und -Strukturen (Größe und Form der Ceroxid-Inseln) den Einfluss der Ceroxid-Oberflächenmodifizierung auf das jeweilige kinetische Phasendiagramm zu untersuchen. Da die katalytische Aktivität von der kristallographischen Orientierung des Substrates abhängig ist, können aus diesen Studien Informationen auf ein Zusammenspiel zwischen kristallographischer Orientierung und den erzeugten wohldefinierten CeOx-Nanostrukturen erwartet werden, die wiederum Rückschlüsse auf die Kopplung zwischen oxidischer Oberfläche und den unterschiedlichen Facetten eines Metallpartikels in einem Realkatalysator erlauben; letztendlich könnten diese Experimente damit zu einer Feinjustierung der katalytischen CO-Oxidation beitragen. Da in Realkatalysatoren auch eine Kommunikation zwischen den einzelnen Facetten der Platinmetall-Partikel erfolgt, soll als Schritt zur Überwindung der Materiallücke (materials gap) der Einfluss von oxidischen Submonoschichten auf die katalytische CO-Oxidation auch an einer polykristallinen Pt-Folie untersucht werden. Bei sonst gleichen Bedingungen (CeOx-Bedeckungsgrad, Temperatur und Sauerstoffpartialdruck) soll auch der Einfluss eines anderen Metallsubstrates auf die Reaktivität des invertierten Modellsystems untersucht werden. Dazu sind zusätzlich analoge Messungen an einem CeOx/Pd(111)-Modellkatalysator geplant.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dr. Jochen Vogt, Dipl.-Phys. Stephan Härtel

Förderer: Haushalt; 01.03.2008 - 28.02.2012

Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie an Physisorbaten auf wohldefinierten Isolator-Einkristalloberflächen

Im Rahmen des Projektes wird auch weiterhin die Adsorption verschiedener kleiner Moleküle wie CO, CO₂, H₂O und anderen an definierten, gespaltenen Isolator-Einkristallflächen untersucht. Diese Systeme sind einerseits für das grundlegende Verständnis der Physisorption, darüber hinaus aber auch für Bereiche wie Atmosphärenchemie oder Geochemie bis hin zur Astrophysik interessant. Infrarotspektren werden hierbei mit polarisiertem Licht als Funktion von Belegung, Druck und Temperatur gemessen; hieraus ergeben sich Informationen z.B. über die "Störung" der Moleküle durch die Wechselwirkung mit dem Substrat, die Zahl der Moleküle pro Elementarzelle in geordneten Systemen, die Homogenität der Adsorbate, Adsorptionsgeometrien, die Ausbildung zweidimensionaler Strukturen, Adsorptionsisothermen und Adsorptionswärmen, und anderes mehr. Die Messungen werden teilweise komplementiert durch LEED-Untersuchungen.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dr. Jochen Vogt, Dipl.-Phys. Stephan Härtel

Förderer: Haushalt; 01.01.2008 - 31.12.2012

Strukturen und Phasenumwandlungen molekularer Adsorbate an Isolatoren mittels höchstempfindlicher Beugung langsamer Elektronen

Ziel des Projektes, das jetzt bereits seit mehreren Jahren (weiter)geführt wird, sind Beiträge zum Verständnis der Adsorption kleiner Moleküle an definierten, gespaltenen Isolator-Einkristallflächen mit Hauptgewichten auf einer allgemeinen Untersuchung der Ausbildung geordneter zweidimensionaler Strukturen in diesen Adsorbaten, der Charakterisierung von Phasenumwandlungen und der Bestimmung lokaler Absolutgeometrien der untersuchten Oberflächen. Von Bedeutung ist in diesem Zusammenhang natürlich auch die umfängliche Charakterisierung der unbedeckten Isolator-Einkristallsubstrate selbst. Als Untersuchungsmethode kommt in erster Linie die Beugung langsamer Elektronen (LEED) mit einem LEED-System mit bildverstärkenden Vielkanalplatten zum Einsatz. Die Messungen werden teilweise durch die Fourier-Transform-infrarotspektroskopische (FTIRS) Charakterisierung der Adsorbate, teilweise auch durch die Kombination von LEED mit Helium-Atomstrahlstreuung (HAS) ergänzt.

Projektleiter: Jun. Prof. Dr. Edgar Haak

Kooperationen: Inst. f. Chemie, OvGU Magdeburg

Förderer: Weitere Stiftungen; 01.04.2008 - 31.03.2011

Entwicklung Neuer Übergangsmetall-Katalysierter Transformationen

The development of new flexible methods to obtain useful added-value products from simple and cheap materials is of high interest. The homogeneous transition metal catalysis delivers various processes and a brought range of new mechanisms to this field. We investigate transition metal catalyzed processes using complexes of redox-coupled ligands to obtain relevant especially nitrogen containing compounds. New ligand systems that are suitable for electronic coupling are developed and their corresponding transition metal complexes are generated. Especially ruthenium cyclopentadienone derivatives provide unique features towards catalytic transformations of bifunctional substrates like propargyl alcohols due to redox-coupling of the dienone ligand and its basic coordination site. Following this concept the range of selective catalytic transformations of propargyl alcohols with ruthenium catalysts could be widely extended. The formation of neutral vinyliden- and allenyliden-species as central intermediates in catalytic cycles is of major interest since these species represent a framework of selectively addressable carbon atoms suitable for regioselective additions of functionalized nucleophiles followed by cyclization-processes. Such catalytic transformations allowing high flexibility regarding suitable educts and stereochemical aspects are applied to the synthesis of simple heterocycles as well as natural products and their analogues.

Projektleiter: Jun. Prof. Dr. Edgar Haak

Förderer: Sonstige; 01.04.2011 - 31.03.2014

Organometallkatalyse mit redox-gekoppelten Ligandensystemen

Flexible Methoden zur Darstellung komplexer Strukturen aus einfachen und leicht zugänglichen Edukten sind von großem Interesse. Unser Forschungsschwerpunkt liegt auf der Entwicklung neuer Übergangsmetall-katalysierter Transformationen, die atomökonomische Zugänge zu komplexen biologisch relevanten Substanzklassen eröffnen. Ein auf mechanistischen Untersuchungen basierendes rationales Katalysator- und Verfahrens-Design sowie sequentiell katalysierte Domino-Prozesse sind dabei von wesentlicher Bedeutung. Die Demonstration des Potentials der entwickelten katalytischen Verfahren erfolgt im Rahmen der Naturstoffsynthese und der flexiblen Darstellung diverser Naturstoffanaloge. Als Katalysatoren dienen Übergangsmetall-Komplexe redox-gekoppelter Ligandensysteme, vorrangig funktionalisierte Ruthenium-Cyclopentadienon-Derivate. Aufgrund der elektronischen Kopplung des Dienon-Liganden und seiner basischen Koordinationsstelle bieten solche Komplexe außergewöhnliche Optionen hinsichtlich katalytischer Transformationen bifunktionaler Substrate wie den einfach sowie in großer Breite zugänglichen Propargyl- und Allylalkoholen. Zudem können elektronische, sterische und stereochemische Aspekte über die Substituenten des Dienon-Ligandensystems gesteuert werden.

Projektleiter: Dr. habil. Jochen Vogt

Förderer: Haushalt; 03.03.2009 - 03.03.2013

Numerische Analyse molekularer Strukturen auf Isolatoreinkristalloberflächen

Die Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen molekularer Strukturen auf Isolaturoberflächen ist im Zusammenhang mit Fragestellungen z. B. in der Geologie oder in der Klimaforschung von erheblichem Interesse. Als Beispiel sei hier das System Wasser/NaCl genannt. Die technologische Bedeutung von Isolaturoberflächen als Trägermaterialien für Schichten funktionaler Moleküle wird darüberhinaus zunehmend erkannt.

Ziel des Projekts ist einerseits die Simulation solcher Strukturen mit Hilfe von quantenchemischen und molekuldynamischen Methoden. Darüberhinaus erfordert die experimentelle Untersuchung von Filmstrukturen mit Hilfe der Beugung langsamer Elektronen (LEED, DLEED) eine nachgeschaltete numerische Auswertung, deren Aufwand z. B. im Falle von Defektstrukturen erheblich ist. Vorhandene Computerprogramme der sogenannten I(V)-Analyse sollen hierzu für den Einsatz auf Großrechnern parallelisiert werden.

6. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

Die 24. Deutsche Zeolith-Tagung wird gemeinsam mit dem Jahrestreffen der Fachgruppe Adsorption in der Zeit vom 7. bis 9. März 2012 an der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg stattfinden. Sie wird vom Chemischen Institut unter Mitwirkung der beiden ProcessNet-Fachgruppen Zeolithe und Adsorption ausgerichtet.

Organisation: Prof. Dr. Franziska Scheffler, Lehrstuhl für Technische Chemie, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg und Prof. Dr. Dieter Bathen, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, Universität Duisburg-Essen

7. Veröffentlichungen

Originalartikel in begutachteten internationalen Zeitschriften

Asrial; Olbrich, Falk; Spoida, Marlies; Fischer, Axel; Edelmann, Frank T.

Crystal engineering with oxo- and cyanocarbon anions - synthesis and structural characterization of triorganotin(IV) pentacyanopropenides and hexacyanoazapentadienides

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 637.2011, 2, S. 190-194;

[Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 1,247]

Bhattacharjee, Sarama; Ranjan Das, Pratik; Ohi, Christiane; Wilker, Viola; Kappa, Mathias; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael

Novel-type inorganic foams from preceramic polymers with embedded titania nanoparticles for photo-catalytic applications

In: Advanced engineering materials. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 13.2011, 11, S. 996-1001; [Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 1,746]

Borchert, Christian; Sundmacher, Kai

Crystal aggregation in a flow tube - image-based observation

In: Chemical engineering & technology. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 34.2011, 4, S. 545-556; [Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 1,394]

Dröse, Peter; Blaurock, Steffen; Hrib, Cristian G. ; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Structural investigation of homoleptic lanthanide(III) tris(pivalamidinates), [tBuC(NiPr) 2] 3Ln (Ln

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 637.2011, 2, S. 186-189;

[Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 1,247]

Dröse, Peter; Blaurock, Steffen; Hrib, Cristian G. ; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structure of a rare unsolvated bis(amidinato) lanthanide chloride, (Piso) 2CeCl (Piso

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 637.2011, 1, S. 31-33; [Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 1,247]

Dröse, Peter; Gottfriedsen, Jochen; Hrib, Cristian G. ; Jones, Peter G. ; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

The first cationic complex of tetravalent cerium

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 637.2011, 3/4, S. 369-373;

[Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 1,247]

Edelmann, Frank T.

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2008

In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 255.2011, 15/16, S. 1834-1920; [Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 10,018]

Edelmann, Frank T.

Multiple-decker sandwich complexes of f-elements

In: New journal of chemistry. - Paris: CNRS, Bd. 35.2011, 1, S. 517-528; [Link unter URL](#); 2011

[Imp.fact.: 2,631]

Lorenz, Volker; Schmiede, Benjamin M. ; Hrib, Cristian G. ; Ziller, Joseph W. ; Edelmann, Anja; Blaurock, Steffen; Evans, William J. ; Edelmann, Frank T.

Unprecedented bending and rearrangement of f-element sandwich complexes induced by superbulky cyclooctatetraenide ligands

In: American Chemical Society: Journal of the American Chemical Society. - Washington, DC: American Chemical

Society, Bd. 133.2011, 5, S. 1257-1259; [Link unter URL](#); 2011
[Imp.fact.: 9,023]

Ohl, Christiane; Kappa, Mathias; Wilker, Viola; Bhattacharjee, Sarama; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael
Novel open-cellular glass foams for optical Applications
In: American Ceramic Society: Journal of the American Ceramic Society. - Malden [u.a.]: Blackwell Publishing, Bd. 94.2011, 2, S. 436-441; [Link unter URL](#); 2010
[Imp.fact.: 2,169]

Traeger, Franziska; Hadnadjev, Milica; Vogt, Jochen; Weiss, Helmut
Structure of CO₂ adsorbed on the KCl(100) surface
In: The journal of physical chemistry. - Washington, DC: Soc., Bd. 115.2011, 25, S. 6986-6996; [Link unter URL](#); 2011
[Imp.fact.: 1,870]

Zaeni, Ahmad; Olbrich, Falk; Hrib, Cristian G. ; Edelmann, Frank T.
Unsolvated [KFI(SiPh₃)_n] (FI = fluorenyl) - a supramolecular chain structure assembled exclusively through K...C-[pi]-bonding
In: Journal of organometallic chemistry. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 696.2011, 10, S. 1935-1938, insges. 4 S.;
[Link unter URL](#); 2011
[Imp.fact.: 2,205]